第 42 卷　第 1 期
2025 年 2 月

应　用　力　学　学　报
Chinese Journal of Applied Mechanics

Vol. 42 No. 1
Feb. 2025

DOI:10. 11776/j. issn. 1000-4939. 2025. 01. 002

基于 DFT 与机器学习的 GaN 电子能带预测及其应变调控

曾言,卞维啸,钟礼,李孝宝

(合肥工业大学土木与水利工程学院,230009 合肥)

摘　要:由于氮化镓(GaN)出色的电学和力电耦合性质,其已成为备受关注的功率半导体材料。其中,电子能带特性和带隙大小是评价半导体材料的重要指标之一。尽管第一性原理计算方法在能带特性预测方面具有高精度的优势,但该方法需要大量计算资源。随着人工智能和数据技术的快速发展,机器学习在新材料的研发和研究中得到了广泛应用。通过基于第一性原理计算得到的不同应变状态下 GaN 晶体电子能带作为特征量的训练集,利用神经网络方法对整个弹性应变空间的能带进行预测。研究结果表明,GaN 晶体在受到不同组合的拉伸、压缩和剪切应变作用下,可以由导体转变为带隙最大为 6 eV 的间隙半导体。通过验证发现,基于神经网络学习算法的预测误差最大为 2%。结果表明,神经网络机器学习方法与第一性原理计算相结合,可显著提升半导体材料电子性质预测的效率和精度。

关键词:第一性原理计算;能带预测;应变调控;神经网络

中图分类号:TP181　　**文献标志码:**A　　**文章编号:**1000-4939(2025)01-0021-08

Strain-tunable electronic bandgaps of GaN by DFT and machine-learning prediction

ZENG Yan, BIAN Weixiao, ZHONG Li, LI Xiaobao

(School of Civil Engineering, Hefei University of Technology, 230009 Hefei, China)

Abstract: Due to its outstanding electrical and piezoelectric properties, GaN has become an extensively studied semiconducting material. The electronic band structure and band gap value are important parameters for evaluating their properties. Although first-principles calculation methods show very high accuracy in predicting electronic band structures, they require extremely high computational resources. With the rapid development of artificial intelligence and data technology, machine learning has been widely applied in research fields of material science. In this study, a training set, consisting of electronic band gaps of GaN crystal subjected to different strain states, was obtained based on first-principles calculations. A neural network method was then established and employed to predict the band structure across the entire elastic strain space. The results show that the GaN crystal can tune from a conductor to a wide-band gap semicon-

收稿日期:2024-04-17

基金项目:安徽省自然科学基金资助项目(No. 2208085MA17);合肥工业大学大学生创新创业资助项目(No. S202310359105)

通信作者:李孝宝,研究员。E-mail:xiaobaoli@hfut. edu. cn

引用格式:曾言,卞维啸,钟礼,等. 基于 DFT 与机器学习的 GaN 电子能带预测及其应变调控[J]. 应用力学学报,2025,42(1):21-28.
ZENG Yan, BIAN Weixiao, ZHONG Li, et al. Strain-tunable electronic bandgaps of GaN by DFT and machine-learning prediction[J]. Chinese journal of applied mechanics, 2025, 42(1):21-28.

ductor with a maximum gap of 6 eV, under different combinations of tensile, compressive, and shear strain states. Further validation shows that the prediction error based on machine learning algorithms is below 2%. The results of this study demonstrate that the combination of neural network machine learning method and first-principles calculations can significantly improve the efficiency and accuracy of electronic bandgap prediction.

Key words: first-principles simulation; electronic band structure; strain engineering; neural network method

氮化镓(GaN)由于具备禁带宽度大、热导率高、介电常数小和力学性质强等优点,被广泛应用于功率电子器件、光电器件和 LED 等领域[1-5]。随着纳米制备技术的不断发展,已有多种 GaN 低维纳米结构被开发,如纳米线[6]、类石墨烯[7]、纤锌矿和闪锌矿 GaN[8]等。近年来,针对上述 GaN 低维纳米结构的研究,多集中于力学[9]和电子性质[10]等。面向电子器件、功率器件和光电器件等的应用,电子能带是重要性质之一。因此高效准确地研究不同工况下 GaN 电子能带具有重要的工程应用价值。

为满足各类功能器件应用的性质要求,研究者们常致力于掺杂[11]、缺陷构造[12]和表界面效应[13]等因素对其电子性质的调控和影响研究。ZHAO 等[14]通过 Mn 元素的掺入,设计出一种具有磁性的 GaN 半导体结构。另一方面,应力-应变工程或其他外场也常被用于对其电子性质的调制。基于密度泛函理论(density functional theory, DFT)的计算方法,焦照勇等[15]对高压作用下闪锌矿结构 GaN 的电子结构、光学性质和弹性性质进行了系统报道。针对 GaN 纳米线结构,MING 等[16]采用紧束缚型密度泛函方法(density-functional tight-blinding, DFTB)研究了电子能带对几何尺寸和应变的依赖规律,发现其能带带隙随直径的增大而减小。

应变工程是当前纳米材料性质调控的重要手段之一,前人研究已表明对纳米结构施加弹性应变可成功调控其包括电学、光电学和催化等诸多特性[17]。此外,在拉伸或压缩应力的作用下,锗的带隙可由间隙转变为直隙[18],带隙宽度也依赖于应力值的大小。针对单晶硅半导体,MANASEVIT 等[19]研究发现弹性应变可显著提升其载流子迁移率。针对Ⅲ-Ⅴ族化合物半导体,单轴压应变可使 GaAs 空穴的迁移率提高 10 倍以上[20]。DANG 等[21]也讨论了应变工程对宽禁带半导体金刚石结构能带的调控机制。类似地,单双轴应变对二维半导体材料的电子能带和载流子性质也有明显调控作用[22]。以上研究工作均表明应变工程对半导体材料的物理和化学性能均有明显调控或优化作用,展现了其广阔的应用前景和巨大的经济效益。

基于密度泛函理论的第一性原理计算经多年的发展,已成为可精确预测材料性能的常用方法。其在新材料开发、光电子器件和清洁能源等多个领域发挥了重要作用。例如随着局部密度泛函(local density approximation, LDA)、广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)和 HSE(Heyd-Scuseria-Ernzerh)等方法的更新优化,在预测电子能带方面的精度不断提高。然而上述方法对计算资源要求极高,因此限制了其在大规模材料筛选以及复杂材料或结构性质研究中的应用。

近些年机器学习凭借其学习模式和探索规律的超强能力,已被广泛应用于图像和语音识别[23]、材料研发[24]和裂纹识别[25]等诸多工程领域。尤其在材料工程研究中,机器学习通过对大量试验数据进行学习和训练,再建立模型实现对材料性质的预测,在计算效率和预测精度方面展现优势。鉴于以上所述第一性原理计算在材料研发领域所展示的高精度和稳定性,再结合机器学习算法的训练和预测能力,可以基于有限的材料性质计算,从而实现快速地筛选,并构建一个完整的数据体系。

WANG 等[26]基于 HSE 第一性原理计算,发展了一种机器学习方法,能够快速准确地筛选出 6 万多种半导体材料。WANG 等[26]利用支持向量机(support vector machine, SVM)建立了分子前体轨道能与共价有机框架材料(covalent organic frameworks, COFs)带边位置之间的线性关系,用于快速筛选具有合适带边位置的 COFs[27]。孙涛等[28]则基于深度学习原子特征方法对"双面神"过渡金属硫化物带隙进行了预测。基于已报道的试验数据,ZHUO 等[29]发展了一种机器学习方法,可有效预测依赖于组分的若干无机半导体材料的能带带宽。MORTAZAVI 等[30]利用 DFT 模拟和机器学习原子势

(machine-learning interatomic potentials, MLIPs)研究了新型单层 C_6N_7 的能量、电子、力学响应和光学特性,证实了 MLIPs 结合 DFT 方法在探索低对称性和高孔隙度导电框架的复杂声子和机械/失效响应方面的效率。此外,机器学习在材料物性调控方面的应用也已见报道,例如 SHI 等[31]利用有限量的第一性原理数据来训练替代模型,研究弹性应变工程调控硅半导体能带带隙的方法,其预测电子带隙的误差仅为 0.008 eV。该模型探索了整个应变空间中的间接-直接带隙转变和半导体-金属性的转变,并得到了将硅纳米结构从超宽带隙材料转变为较小带隙半导体的最优应变路径。HUANG 等[32]通过计算单原子在单空位石墨烯表面的吸附能和距离,建立了(back propagation neural network, BPNN)模型,并成功预测了整个周期表原子在单空位石墨烯表面的吸附行为。CHANEY 等[33]采用了一种有监督的机器学习模型,利用集群线性回归来预测锂原子在二维过渡金属硫化物(transition metal dichalcogenides, TMDs)表面的吸附能。

然而通过文献梳理,发现全弹性应变空间内 GaN 电子能带性质的变化尚缺乏系统研究。利用有限的第一性原理计算结果数据,结合机器学习方法进行预测是一种可行的途径。鉴于此,本研究基于第一性原理计算获取各工况下的电子能带数据集,再通过神经网络机器学习进行预测,最后通过少量的第一性原理计算再次验证预测值,并分析误差校正模型参数从而获得弹性应变空间内 GaN 的能带性质。

1　计算方法与模型

本研究采用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法,对本征以及受不同应变作用下的 GaN 晶体结构和电子能带进行计算分析。第一性原理模拟在开源程序计算包 Quantum Espresso (http://www.quantum-espresso.org/)[34-35]执行。本研究采用广义梯度近似(generalized gradient approximation, GGA)中的(Perdew-Burke-Ernzerhof, PBE)泛函处理材料体系中的交换关联能,选择超软赝势描述其中离子与价电子之间的相互作用。为获得高精度的计算结果,本研究将平面波动能截断能量设置为80 Ry,弛豫能量收敛标准设置为 1×10^{-4} eV,原子所受作用力小于 0.02 eV/Å。弛豫过程中 k 点网格数被设置为 $8\times8\times8$。本研究涉及的所有计算参数均通过收敛性测试选取。各应变状态下模型能带结构的计算还需要通过自洽计算和非自洽计算 2 个步骤,最终得到训练集所需的数据。值得注意的是本研究涉及的应变状态均为准静态,因此未考虑加载应变率的影响。

本研究采用图 1 所示的纤锌矿三维晶体结构作为模拟单胞,晶向分别取为 a[100]、b[010]和 c[001],并对其受多种组合应变作用下结构(图 2)的电子能带进行详细的计算分析。

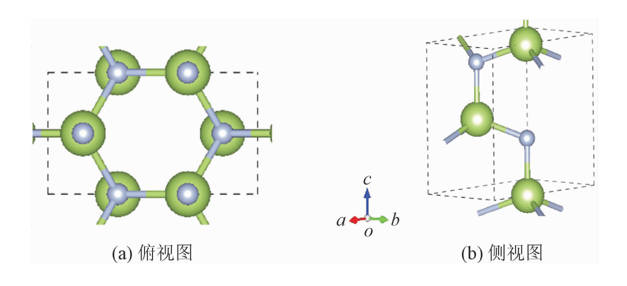


图 1　矩形计算单胞示意图

Fig. 1　The schematic diagram for computational supercell

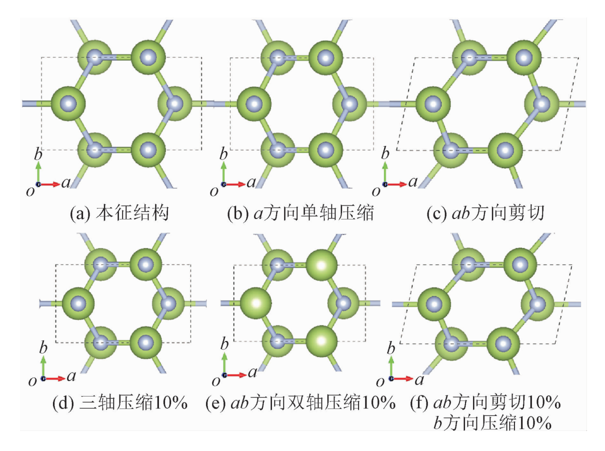


图 2　不同应变状态下计算单胞示意图

Fig. 2　The computational supercell subjected to various strains

模型中含 4 个 Ga 和 4 个 N 原子。首先分别沿 a、b、c 方向(分别对应 x、y、z 方向)施加单轴拉伸(或压缩)应变,单轴应变(ε)定义为沿相应方向晶格常数的变化量($\Delta\alpha$)与原始晶格常数(α)之比(即 $\varepsilon=\Delta\alpha/\alpha$)。据此,沿该方向的原子位移可给定为 $u_i=u_0+u_0\cdot\varepsilon$。通过模拟计算 GaN 晶体结构泊松比约为 0.2。测试发现较小应变状态时(例如 ±5%)泊松效应的影响可忽略,而应变较大时多展现导体特征,少数应变状态下半导体能带带隙仍在机器学习预测的范围之内,因此本研究未考虑泊松效应对能带带隙的影响。另一方面,纯剪切应变状态 ε_{xy} 下原子位移可通过 $u_{ix}=x_i+y_i\cdot\varepsilon_{xy}$ 给出,应变

状态下晶格向量按照类似的方式设定。此处强调无论是否施加应变,本研究均对模拟晶胞及其内部的所有原子位置进行充分的弛豫。

迄今为止,已有多种机器学习的算法被相继提出并应用于不同领域的研究。例如人工神经网络、支持向量机、随机森林这3种机器学习算法。人工神经网络(artificial neural networks,ANN)具有较强的表达能力,若其具有足够的节点或参数,即可以任意精度逼近几乎任何函数[36]。特别地,ANN可以自动提取样本或输入数据的隐藏深层特征。由于上述2个优势,人工神经网络被广泛应用于材料科学研究领域,例如电子能带带隙[37-38]和其他材料属性的预测等[39-41]。其结构包括输入层、隐藏层和输出层,神经网络每一层包含很多节点,每个节点称为神经元。输入层神经元接收训练集的输入特征,经过隐藏层的处理后由输出层输出。隐藏层中每个节点的值等于将前一层所有节点值权重线性加和后,再通过激活函数做非线性变换得到。

支持向量机的基本思想是通过非线性映射将输入向量映射到1个高维特征空间,然后在该空间中构造1个最优决策超平面,该方法避免了显式的非线性映射,可以克服高维特征空间带来的计算困难,已诞生多种支持向量机方法[42]。随机森林算法是由GIANNOZZI等[35]在2001年提出的一种基于传统决策树的统计学习理论,对其最基本的数学语言论述就是利用boostrap重抽样方法,从原始样本中抽取多个样本,之后再对抽取的样本进行决策树建模,通过取均值的方式组合多棵决策树的预测来得到最终的预测结果。当其应用于回归预测问题时,在基于传统单颗回归树的基础上,组合了大量回归树的预测结果,提高了预测精度。该算法的优点是具有较高精确度,不容易出现过拟合现象。

为选取1种高效准确预测GaN能带带隙的机器学习算法,本研究首先获取沿 a 向受单轴拉伸的带隙数据并将其分为训练集与测试集进行以上3种不同方法的预测试验对比。本研究采用均方根误差(root mean square error,RMSE)对所提方法的预测精度进行了对比分析,其中训练集和测试集分别为12个和6个(表1)。

表1 3种机器学习算法所得RMSE对比(单位:eV)

Tab.1 Comparison of RMSE between three types of machine learning methods (unit:eV)

带隙数据	神经网络	支持向量机	随机森林
训练集	0.024 5	0.143 2	0.382 7
测试集	0.072 1	0.117 2	0.316 1

本研究的整个电子能带预测过程具体可分为3步完成。第1步:通过第一性原理直接计算,得到一定数量不同应变状态下的GaN晶体结构的能带带隙值(即特征值)作为机器学习的数据集,取其中一部分构成测试集数据,其余则作为训练集数据。这一过程中首先展开单特征值的训练,获得高精度单轴应变方向预测模型,再利用该模型得到的预测值补充数据集。然后,基于补充好的单轴应变数据集开展多特征值训练,根据预测精度调整神经网络节点数以及层数,通过误差逆传播算法获得各节点的阈值及权重参数,建立针对多维特征值空间的神经网络模型。第2步:可利用神经网络对未直接采用第一性原理计算其他工况下的能带进行预测。第3步:为了进一步评价神经网络机器学习的预测精度,本研究还选取部分应变状态下GaN晶体结构通过第一性原理计算所得能带带隙作为验证数据集,与同样应变状态下的神经网络学习预测结果进行对比分析(表2)。

表2 第一性原理计算与神经网络预测所得能带带隙比较

Tab.2 Comparison of the electronic band structures by first-principles simulations and neural network

应变类型[ε_x, ε_y, ε_z]	第一性原理计算带隙/eV	神经网络预测带隙/eV	绝对误差/eV	相对误差/%
[−15%, −14%, −13%]	4.290 4	4.273 5	0.016 9	0.39
[−9%, −7%, −11%]	3.618 4	3.608 5	0.009 9	0.27
[0%, −11%, 3%]	1.141 4	1.140 5	0.000 9	0.07
[10%, 2%, −1%]	0.871 1	0.867 5	0.003 6	0.40
[14%, 1%, −3%]	0.684 8	0.697 0	0.012 2	1.70
[−15%, 7%, −13%]	2.123 2	2.157 5	0.034 3	1.60

整个过程的具体逻辑如图3所示,本研究利用 x、y、z 单轴,xy、yz、zx、$-xy$、$-yz$、$-zx$ 双轴以及 xyz、$-xyz$、$x-yz$ 和 $xy-z$ 三轴(此处“−”代表沿相应方向施加压缩)的共13种应变状态下的150个第一性

原理计算所得能带带隙数据构成训练集。首先利用沿 x、y 或 z 单轴方向 80% 的数据构成训练集,20% 的数据构成测试集,建立一维神经网络模型。利用该模型预测每 2 个第一性原理计算点之间的未直接计算点(每个间隔补充 2 个预测能带数据),进一步充实单轴拉伸压缩能带数据库实现数据增强。给出少量第一性原理计算所得针对 xy、yz、zx、$-xy$、$-yz$、$-zx$ 双轴应变作用下的能带带隙,建立二维神经网络模型,预测并增强二维弹性应变空间数据集。再次给定少量第一性原理计算所得 xyz、$-xyz$、$x-yz$ 和 $xy-z$ 三轴应变状态下的能带带隙值补充训练数据集。至此,所建立的神经网络模型训练集共利用了针对 13 种应变状态下的 150 个第一性原理计算所得数据。压剪应变组合作用下的能带带隙研究采用类似的步骤进行数据增强和预测。

通过针对 x、y、z 单轴方向的拉压应变作用下的能带预测模型研究发现预测精度可达千分之一。使用上述应变状态的机器学习预测结果进行数据增强后,所得最终神经网络预测模型的误差影响可以忽略不计。针对 13 种应变状态的第一性原理所得原始数据以及神经网络增强补充最终所构成的数据集由 300 个数据构成。经过上述步骤,既可以减少第一性原理计算成本,节约计算资源,又可以有效提高预测精度。

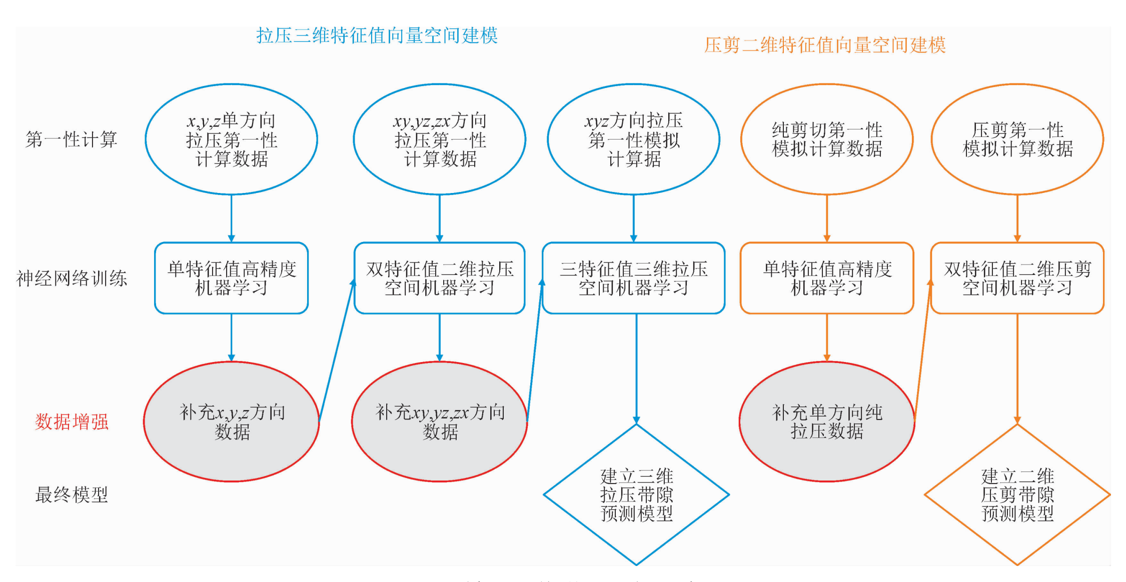


图 3　神经网络学习逻辑示意图

Fig. 3　Schematic diagram for neural network algorithm

2　计算结果与结论

2.1　本征 GaN 结构的第一性原理计算

本研究首先通过优化算法得到本征状态的 GaN 纤锌矿晶体结构,其对应的矩形单胞晶格常数 a、b、c 分别为 5.57、3.22、5.24 Å,与已有文献报道的结果吻合较好[10]。需要说明的是为了应变施加方便,本研究将本征状态 GaN 经典六方晶格变换为矩形晶格。如图 4 所示,本征 GaN 纤锌矿晶体具有1.73 eV 的直隙能带结构,与文献所报道基于 LDA 泛函计算结果 1.71 eV 吻合较好(误差仅为 1.1%)[10]。此处指出,尽管文献中也有基于 GGA 和 HSE 等更精确的密度泛函第一性原理预测结果,然而这些方法一般耗时更长。本研究主要目的在于提出一种可结合第一性原理计算和神经网络机器学习的更高效经济的能带预测策略。

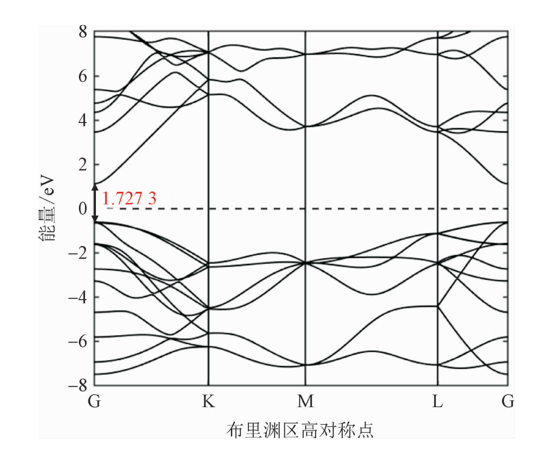


图 4　本征状态 GaN 晶体能带结构图

Fig. 4　Electronic band structure of the intrinsic GaN crystalline

2.2 应变调控能带结构

获得本征状态 GaN 的电子能带结构后，按照第 1 节所述方法对其施加应变并计算相应状态下的晶体结构和能带性质。图 5 展示了部分代表性应变状态下 GaN 晶体的能带结构。

利用所得能带带隙数据训练神经网络模型中描述 GaN 带隙与所加三轴应变的函数关系。通过反复训练并优化学习模型参数，最终所得相应状态下的带隙预测值的相对误差保持 2% 以内（表 2），带隙绝对误差（mean absolute error，MAE）平均值控制在 12 meV 以内。

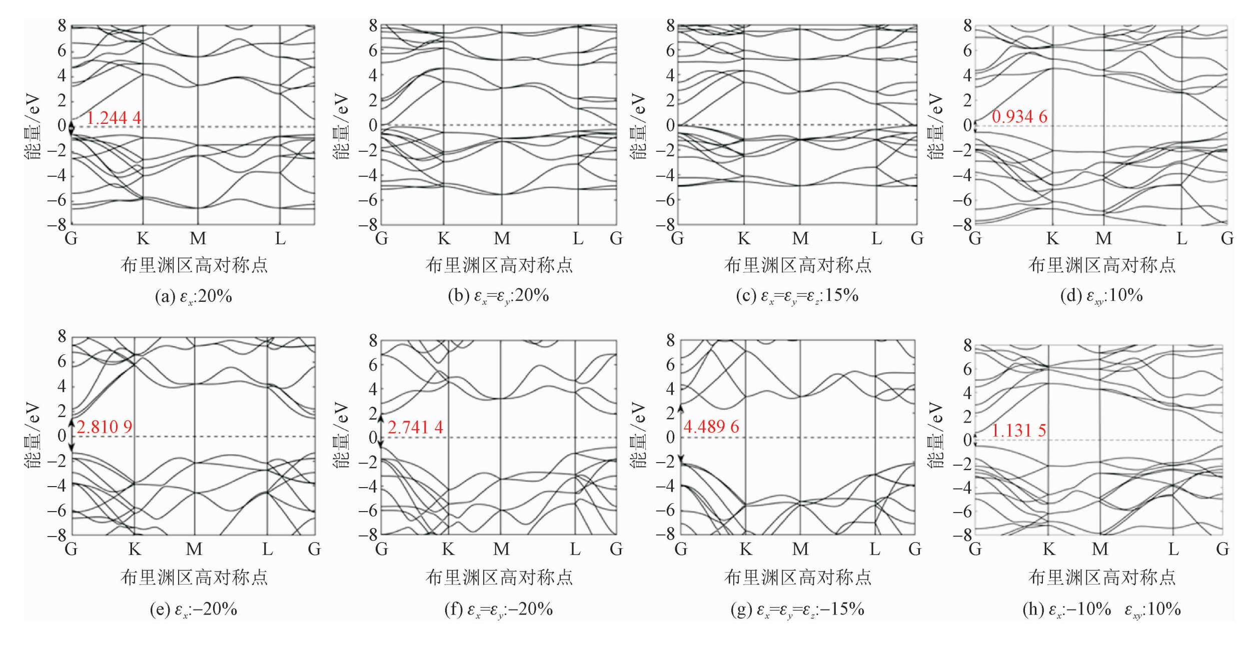


图 5 部分单、双、三轴应变状态下第一性原理计算所得 GaN 电子能带结构

Fig. 5 Electronic band structures for GaN crystalline subjected to various uni-, bi- and tri-axial strains by first-principles calculations

如图 6 所示的能带带隙云图，颜色深度代表不同应变状态下能带带隙的大小，可观察到 GaN 晶体在三轴弹性应变空间 20% 内的任一状态下的带隙预测值。特别地，根据该预测结果，可以更直观的按照应用需求能带带隙的大小决定需要对 GaN 晶体结构施加的应变状态。

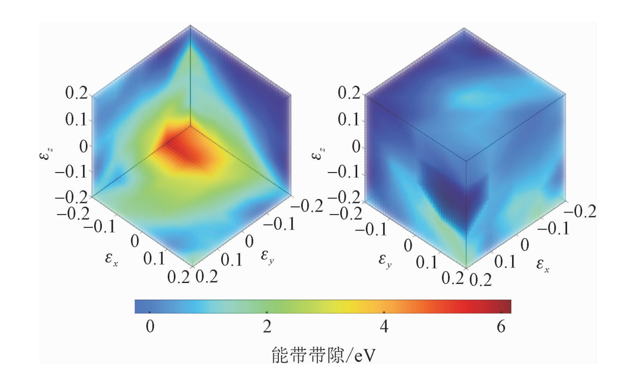


图 6 神经网络预测所得三轴应变状态下的能带带隙

Fig. 6 Predicted electronic band gaps for GaN crystalline subjected to a variety of strains by neural network

从图 6 中还可以看出，在所施加的应变较小时，例如 5% 以内，GaN 的带隙变化幅度较小，保持在 1.7 eV左右，即接近于本征状态下的能带值。该结果表明应变较小时对 GaN 电子能带带隙值影响也比较微弱。进一步观察发现，当三轴拉伸应变达到 7% 时，GaN 晶体的能带带隙消失，转变为导体。多数情况下，随着任一单轴拉伸应变值的增大，GaN 带隙宽度呈减小趋势，逐渐趋向于导体。反之，若对其施加三轴压缩应力，尤其是压应变值分别为（−20%、−10%、−20%）时，可获得 6 eV 以上的能带带隙。

图 7 展示了 GaN 晶体结构受压剪共同作用下能带带隙变化云图，可以看出整个压剪弹性应变空间内其均为半导体。能带带隙对剪切应变的依赖性较为微弱，最大带隙出现在 ±5% 应变范围内。值得提出的是针对每个应变状态下第一性原理计算能带耗费机时相对较长，例如每种应变状态下从结构优化到能带计算机时平均耗费 64 800 s（18 核时），而采用训练好的神经网络算法在普通计算机仅耗时约 1 s。

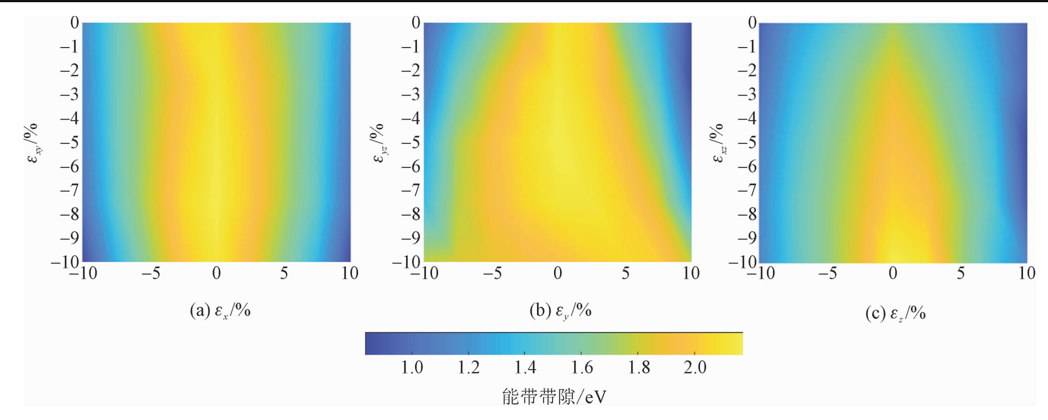


图 7 组合应变状态下的能带带隙

Fig. 7 Predicted electronic band gaps for GaN crystalline subjected to a variety of compressive-shear strains by neural network

3 结 论

本研究基于 DFT 的第一性原理模拟计算构建关于具有纤锌矿结构 GaN 晶体的电子能带数据集,建立神经网络机器学习模型,预测其受到三轴弹性拉伸、压缩、剪切以及组合变形工况下的带隙宽度变化规律。

预测结果表明 GaN 在上述弹性应变空间内可从半导体转变为导体。利用有限数量的第一性原理模拟数据训练代理模型,本研究的神经网络算法预测的 GaN 带隙相对误差在 2% 以内。本研究证明,第一性原理模拟和机器学习相结合可准确高效地预测弹性应变作用下材料的电子能带性质,为微电子器件、光电器件和能源领域中材料性质研究提供了通用框架,具有广泛的实际工程应用前景。

参考文献:

[1] CHEN Y X,LIU J X,LIU K L,et al. GaN in different dimensionalities:properties, synthesis, and applications[J]. Materials science and engineering:r:reports,2019,138:60-84.

[2] BALIGA B J. Gallium nitride devices for power electronic applications[J]. Semiconductor science and technology, 2013, 28 (7): 074011.

[3] PEARTON S J,REN F. GaN electronics[J]. Advanced materials, 2000,12(21):1571-1580.

[4] NAKAMURA S. Nobel lecture:background story of the invention of efficient blue InGaN light emitting diodes[J]. Reviews of modern physics,2015,87(4):1139-1151.

[5] FASOL G. Room-temperature blue gallium nitride laser diode[J]. Science,1996,272(5269):1751-1752.

[6] 杨孟骐,姬宇航,梁琦,等. 四方结构 GaN 纳米线制备、掺杂调控及其场发射性能研究[J]. 物理学报,2020,69(16):167805.
YANG Mengqi, JI Yuhang, LIANG Qi, et al. Preparation, doping modulation and field emission properties of square-shaped GaN nanowires[J]. Acta Physica Sinica, 2020, 69 (16): 167805 (in Chinese).

[7] SANDERS N,BAYERL D,SHI G S,et al. Electronic and optical properties of two-dimensional GaN from first-principles[J]. Nano letters,2017,17(12):7345-7349.

[8] KANG S,KANG B K,KIM S W,et al. Growth and characteristics of zinc-blende and wurtzite GaN junctioned branch nanostructures [J]. Crystal growth & design,2010,10(6):2581-2584.

[9] 邓师哲,千宇,尚福林. c-GaN 材料摩擦响应与磨损特性的分子动力学模拟研究[J]. 应用力学学报,2021,38(5):1775-1781.
DENG Shizhe,QIAN Yu,SHANG Fulin. Friction response and wear property of c-GaN crystal by a molecular dynamics study[J]. Chinese journal of applied mechanics, 2021, 38 (5): 1775-1781 (in Chinese).

[10] ONEN A,KECIK D,DURGUN E,et al. GaN:from three- to two-dimensional single-layer crystal and its multilayer van der Waals solids[J]. Physical review b,2016,93(8):085431.

[11] PAMPILI P,PARBROOK P J. Doping of III-nitride materials[J]. Materials science in semiconductor processing,2017,62:180-191.

[12] PAN Y. Influence of N-vacancy on the electronic and optical properties of bulk GaN from first-principles investigations[J]. International journal of energy research,2021,45(10):15512-15520.

[13] XIAO M X,YAO T Z,AO Z M,et al. Tuning electronic and magnetic properties of GaN nanosheets by surface modifications and nanosheet thickness [J]. Physical chemistry chemical physics, 2015,17(14):8692-8698.

[14] ZHAO Q,XIONG Z H,LUO L,et al. Design of a new two-dimensional diluted magnetic semiconductor: Mn-doped GaN monolayer [J]. Applied surface science,2017,396:480-483.

[15] 焦照勇,杨继飞,张现周,等. 闪锌矿 GaN 弹性性质、电子结构和光学性质外压力效应的理论研究[J]. 物理学报,2011,60(11):117103.
JIAO Zhaoyong, YANG Jifei, ZHANG Xianzhou, et al. Theoretical investigation of elastic, electronic, and optical properties of zinc-blende structure GaN under high pressure[J]. Acta Physica Sinica,2011,60(11):117103.

[16] MING B M,WANG R Z,YAM C Y,et al. Bandgap engineering of GaN nanowires[J]. AIP advances,2016,6(5):055018.

[17] 李巨,单智伟,马恩. 弹性应变工程[J]. 中国材料进展,2018,

37(12):941-948.

LI Ju,SHAN Zhiwei,MA En. Elastic strain engineering[J]. Materials China,2018,37(12):941-948(in Chinese).

[18] MICHEL J,LIU J F,KIMERLING L C. High-performance Ge-on-Si photodetectors[J]. Nature photonics,2010,4(8):527-534.

[19] MANASEVIT H M,GERGIS I S,JONES A B. Electron mobility enhancement in epitaxial multilayer Si-$Si_{1-x}Ge_x$ alloy films on (100) Si[J]. Applied physics letters,1982,41(5):464-466.

[20] SUN Y,THOMPSON S E,NISHIDA T. Physics of strain effects in semiconductors and metal-oxide-semiconductor field-effect transistors[J]. Journal of applied physics,2007,101(10):104503.

[21] DANG C Q,LU A L,WANG H Y,et al. Diamond semiconductor and elastic strain engineering[J]. Journal of semiconductors,2022,43(2):021801.

[22] ZHONG L,LI X B,WANG W,et al. Electromechanical and photoelectric properties of a novel semiconducting Janus InGaSSe monolayer[J]. Journal of semiconductors,2023,44(1):012701.

[23] LIU S S,TIAN Y T. Facial expression recognition method based on gabor wavelet features and fractional power polynomial kernel PCA [C]//Advances in Neural Networks-ISNN 2010. Berlin, Heidelberg:Springer Berlin Heidelberg,2010:144-151.

[24] BASSMAN OFTELIE L, RAJAK P, KALIA R K, et al. Active learning for accelerated design of layered materials[J]. npj computational materials,2018,4(1):74.

[25] 毛晓敏,张慧华,纪晓磊,等. 基于XFEM与BP神经网络的裂纹智能识别[J]. 应用力学学报,2022,39(6):1158-1167.

MAO Xiaomin,ZHANG Huihua,JI Xiaolei,et al. Intelligent crack identification based on XFEM and BP neural network[J]. Chinese journal of applied mechanics,2022,39(6):1158-1167(in Chinese).

[26] WANG T,TAN X X,WEI Y D,et al. Accurate bandgap predictions of solids assisted by machine learning[J]. Materials today communications,2021,29:102932.

[27] SATO M. First-principles modeling in the context of dielectric materials science and design[C]//2021 IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena (CEIDP). Piscataway, NJ,USA:IEEE,2021:85-88.

[28] 孙涛,袁健美. 基于深度学习原子特征表示方法的Janus过渡金属硫化物带隙预测[J]. 物理学报,2023,72(2):028901.

SUN Tao,YUAN Jianmei. Prediction of band gap of transition metal sulfide with Janus structure by deep learning atomic feature representation method[J]. Acta Physica Sinica,2023,72(2):028901 (in Chinese).

[29] ZHUO Y,MANSOURI TEHRANI A,BRGOCH J. Predicting the band gaps of inorganic solids by machine learning[J]. The journal of physical chemistry letters,2018,9(7):1668-1673.

[30] MORTAZAVI B,SHOJAEI F,SHAPEEV A V,et al. A combined first-principles and machine-learning investigation on the stability, electronic,optical,and mechanical properties of novel C_6N_7-based nanoporous carbon nitrides[J]. Carbon,2022,194:230-239.

[31] SHI Z,TSYMBALOV E,DAO M,et al. Deep elastic strain engineering of bandgap through machine learning[J]. Proceedings of the national academy of sciences of the United States of America, 2019,116(10):4117-4122.

[32] HUANG J T,XUE J T,LI M W,et al. Adsorption and modification behavior of single atoms on the surface of single vacancy graphene: Machine learning accelerated first principle computations[J]. Applied surface science,2023,635:157757.

[33] CHANEY G,IBRAHIM A,ERSAN F,et al. Comprehensive study of lithium adsorption and diffusion on Janus Mo/WXY (X,Y=S, Se,Te) using first-principles and machine learning approaches [J]. ACS applied materials & interfaces,2021,13(30):36388-36406.

[34] GIANNOZZI P,ANDREUSSI O,BRUMME T,et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO[J]. Journal of physics:condensed matter,2017,29(46):465901.

[35] GIANNOZZI P, BARONI S, BONINI N, et al. QUANTUM ESPRESSO:a modular and open-source software project for quantum simulations of materials[J]. Journal of physics:condensed matter, 2009,21(39):395502.

[36] 刘端阳,魏钟鸣. 有监督学习算法在材料科学中的应用[J]. 数据与计算发展前沿,2023,5(4):38-47.

LIU Duanyang,WEI Zhongming. Application of supervised learning algorithms in materials science[J]. Frontiers of data & computing, 2023,5(4):38-47(in Chinese).

[37] KUMAR U,NAYAK S,CHAKRABARTY S,et al. Gallium-boron-phosphide ($GaBP_2$):a new Ⅲ-Ⅴ semiconductor for photovoltaics [J]. Journal of materials science,2020,55(22):9448-9460.

[38] FABER F A,HUTCHISON L,HUANG B,et al. Prediction errors of molecular machine learning models lower than hybrid DFT error [J]. Journal of chemical theory and computation,2017,13(11): 5255-5264.

[39] 张纯,罗金,李登鹏. 基于深度神经网络的力学场量代理计算模型研究[J]. 应用力学学报,2021,38(2):552-559.

ZHANG Chun,LUO Jin,LI Dengpeng. Research on surrogate calculation model of mechanical quantity field based on neural network[J]. Chinese journal of applied mechanics,2021,38(2):552-559(in Chinese).

[40] TONG W,WEI Q,YAN H Y,et al. Accelerating inverse crystal structure prediction by machine learning:a case study of carbon allotropes[J]. Frontiers of physics,2020,15(6):63501.

[41] ZHU Z,DONG B J,GUO H H,et al. Fundamental band gap and alignment of two-dimensional semiconductors explored by machine learning[J]. Chinese physics b,2020,29(4):046101.

[42] 丁世飞,齐丙娟,谭红艳. 支持向量机理论与算法研究综述 [J]. 电子科技大学学报,2011,40(1):1-10.

DING Shifei,QI Bingjuan,TAN Hongyan. An overview on theory and algorithm of support vector machines[J]. Journal of University of Electronic Science and Technology of China,2011,40(1):1-10 (in Chinese).

(编辑 黄崇亚 吕茵)